LC/MS Application News No.96

ペプチドの分析（2）

キャピラリーHPLCとイオントラップ型LC/MSを組み合わせて、ペプチドの分析を行いました。

イオントラップ型LC/MSはMSを複数回（MS^{11}まで）繰り返すことが可能で、このMS^n機能を利用してペプチドのシークエンス情報を得ることができます。また、No.62のアプリケーションニュースでも紹介したPeptide toolsに含まれるbuilding blocks editとcollision induced dissociation view機能を利用することによって、フラグメントイオンの帰属を簡単に行うことが可能です。

ここでは、自動的にMS/MSを繰り返すAuto MS/MSモードで測定を行いました。

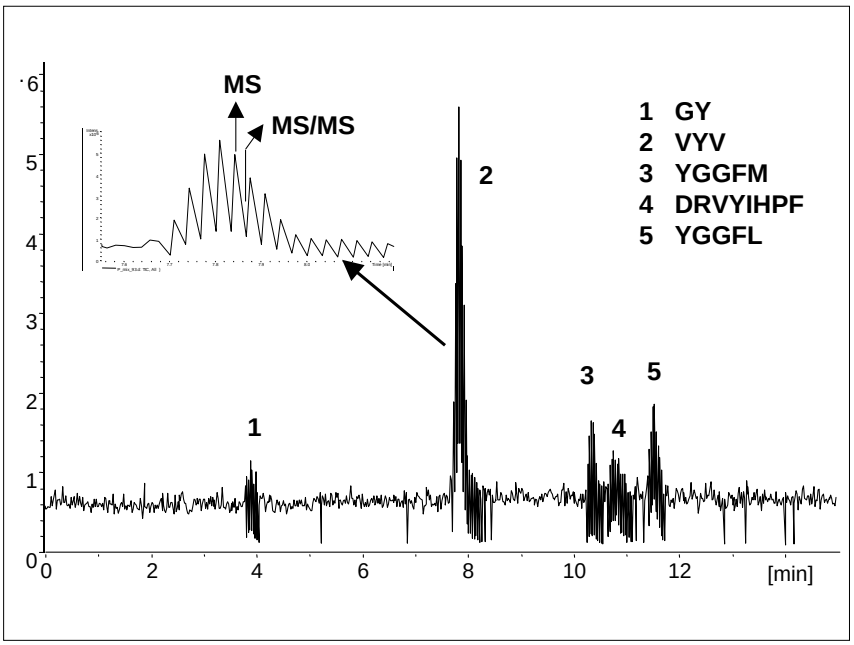

Fig.1 Auto MS/MS TIC of peptides mixture

Table 1 HPLC and MSD conditions

HPLC		MS	
Instrument	: Agilent 1100 Capillary system Capillary Pump Column Thermostat Micro Autosampler Diode Array Detector	Instrument	: Agilent 1100MSD Trap
Column	: Zorbax SB C18（3.5μm, 0.3×150mm）	Mass range	: 100 ～ 1200（m/z）
Mobile phase	: A：0.05% TFA B：CH_3CN（0.05% TFA）	Ionization	: ESI
		Nebulizer	: N_2（40 psi）
		Drying gas	: N_2（8 L/min, 300 ℃）
		Polarity	: Positive
		Capillary exit	: 90V
		Mode	: Auto MS/MS
Gradient	: B（10%）－（50%） 0min－15min	Auto MS/MS	: 350 ～ 750（m/z）
Flow rate	: 5 μl/min		
Oven temp.	: 35 ℃		
Injection vol.	: 0.2μl		
Sample	: Peptides mixture（each 10ng/μl） 1 Gly-Tyr 2 Val-Tyr-Val 3 Methionine enkephalin 4 Leucine enkephalin 5 Angiotensin II		

1. Gly-Tyr ; GY MW 238
2. Val-Tyr-Val ; VYV MW 379
3. Methionine enkephalin (Tyr-Gly-Gly-Phe-Met) ; YGGFM MW 573
4. Leucine enkephalin (Tyr-Gly-Gly-Phe-Leu) ; YGGFL MW 555
5. Angiotensin II (Asp-Arg-Val-Tyr-IIe-His-Pro-Phe) ;DRVYIHPF MW 1046

Agilent Technologies

TI 16B2G1-096
2001.9 発行

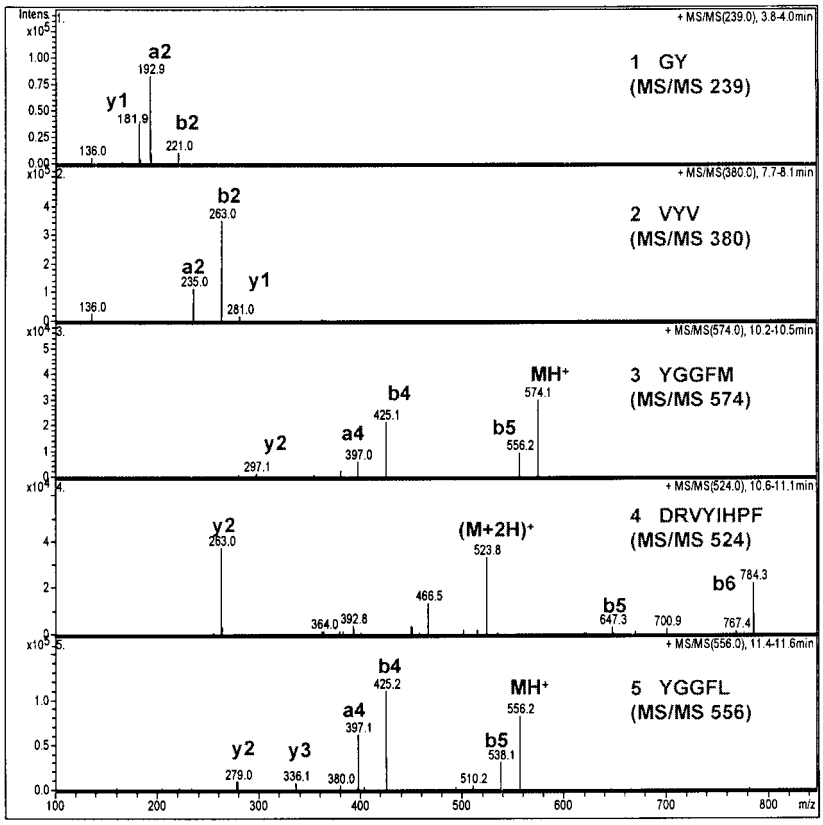

Fig.2　Auto MS/MS spectra of peptides mixture

CID of YGGFL (Positive ion mode and Most Abundant MW)

a-series and x-series			
a1	**136.1**	**x4**	**419.2**
a2	**193.1**	**x3**	**362.2**
a3	**250.1**	**x2**	**305.2**
a4	**397.2**	**x1**	**158.1**
a5	**510.3**		
b-series and y-series			
b1	**164.1**	**y4**	**393.2**
b2	**221.1**	**y3**	**336.2**
b3	**278.1**	**y2**	**279.2**
b4	**425.2**	**y1**	**132.1**
b5	**538.3**		
c-series and z-series			
		z5	**539.3**
c1	**181.1**	**z4**	**376.2**
c2	**238.1**	**z3**	**319.2**
c3	**295.1**	**z2**	**262.1**
c4	**442.2**	**z1**	**115.1**

CID of YGGFM (Positive ion mode and Most Abundant MW)

a-series and x-series			
a1	**136.1**	**x4**	**437.1**
a2	**193.1**	**x3**	**380.1**
a3	**250.1**	**x2**	**323.1**
a4	**397.2**	**x1**	**176.0**
a5	**528.2**		
b-series and y-series			
b1	**164.1**	**y4**	**411.2**
b2	**221.1**	**y3**	**354.1**
b3	**278.1**	**y2**	**297.1**
b4	**425.2**	**y1**	**150.1**
b5	**556.2**		
c-series and z-series			
		z5	**557.2**
c1	**181.1**	**z4**	**394.1**
c2	**238.1**	**z3**	**337.1**
c3	**295.1**	**z2**	**280.1**
c4	**442.2**	**z1**	**133.0**

CID of DRVYIHPF (Positive ion mode and Most Abundant MW)

a-series and x-series			
a1	**88.0**	**x7**	**957.5**
a2	**244.1**	**x6**	**801.4**
a3	**343.2**	**x5**	**702.3**
a4	**506.3**	**x4**	**539.3**
a5	**619.4**	**x3**	**426.2**
a6	**756.4**	**x2**	**289.1**
a7	**853.5**	**x1**	**192.1**
a8	**1000.5**		
b-series and y-series			
b1	**116.0**	**y7**	**931.5**
b2	**272.1**	**y6**	**775.4**
b3	**371.2**	**y5**	**676.3**
b4	**534.3**	**y4**	**513.3**
b5	**647.4**	**y3**	**400.2**
b6	**784.4**	**y2**	**263.1**
b7	**881.5**	**y1**	**166.1**
b8	**1028.5**		
c-series and z-series			
		z8	**1029.5**
c1	**133.1**	**z7**	**914.5**
c2	**289.2**	**z6**	**758.4**
c3	**388.2**	**z5**	**659.3**
c4	**551.3**	**z4**	**496.3**
c5	**664.4**	**z3**	**383.2**
c6	**801.4**	**z2**	**246.1**
c7	**898.5**	**z1**	**149.1**

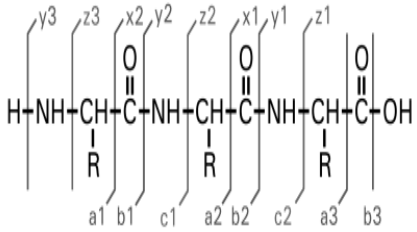

Fig.3　CID fragment ions of peptides with Peptide Tools

本書の一部または全部を無断複製することは禁止されています。　〔記載内容は、お断りなく変更することがあります。また記載内容は検収条件ではありません。〕